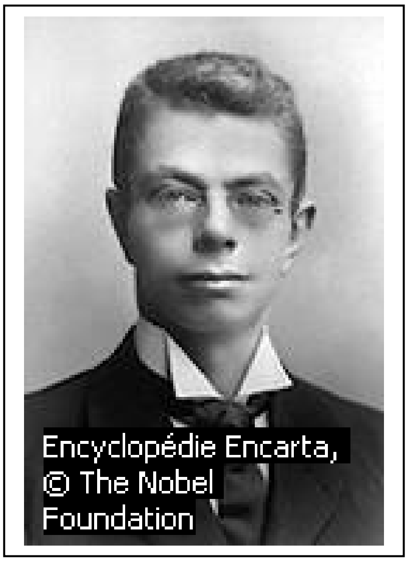
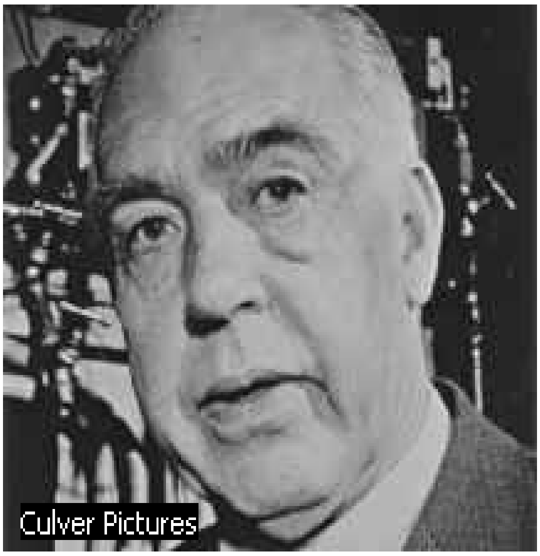
Chapitre 6
MODELE SEMI QUANTIQUE

Modèle classique : Ermest RUTHERFORD (physicien Anglais)
Modèle semi-classique : Niels BOHR (physicien Danois)
Zeeman, Pieter (physicien allemand)



Pieter Zeeman



Niels Bohr

Bohr,Niels (1885-1962), physicien danois, reçoit le prix Nobel en 1922 pour la théorie de la structure atomique.

Zeeman, Pieter (1865-1943), physicien néerlandais, prix Nobel pour sa découverte de l'*effet Zeeman* qui traduit la propriété électrpmagnétique de
la lumière

1– MODÈLE CLASSIQUE : PERRIN ET RUTHERFORD

L'atome a été défini comme un ensemble, formé par un noyau entouré d'électrons. Ces derniers sont liés au noyau par l'influence de l'énergie potentielle et de l'énergie cinétique. La discussion va être portée sur l'atome le plus simple, l'atome d'hydrogène.

$E_1 = E_p + E_c$ ou E_p : énergie potentielle
E_c : énergie cinétique

Le potentiel crée par une charge +e à une distance r est

$$V = \frac{e}{4\Pi\varepsilon_, r}$$

L'énergie potentielle existante entre une charge +e et une charge –e a pour expression.

$$Ep = -eV = -\frac{e}{4\Pi\varepsilon_, r}\, e = -\frac{e^2}{4\Pi\varepsilon_, r}$$

$$Ep = -\frac{1}{4\Pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r}$$

Autrement dit, l'énergie potentielle de position de l'électron, situé à une distance r par rapport au noyau, sous l'effet de la force d'attraction de coulomb, est déduite par la relation :

$$Ep = \int_\infty^r f\, dr = \int_\infty^r \frac{kq_1q_2}{r^2}dr = -\frac{kq_1q_2}{r}, \qquad (q = e)$$

$$Ep = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{e^2}{r} \quad ou \quad Ep = -K\frac{e^2}{r}$$

Lorsque l'électron tourne autour du noyau de charge positive, il adopte un mouvement circulaire selon Rutherford. Les forces qui s'impliquent dans le système sont de genre électrostatique.

Par application de la 1ere loi de Newton au système qui est soumis à l'accélération normale,

$$\Sigma\vec{F} = m\vec{\gamma}$$

$$\vec{fe} = m\vec{\gamma}_N$$

$$\vec{\gamma} = \vec{\gamma}_N + \vec{\gamma}_i \quad avec \quad \vec{\gamma}_i = \vec{o}$$

Alors

$$\frac{1}{4\Pi\varepsilon,}\frac{e^2}{r^2} = m\frac{v^2}{r}$$

$$\Rightarrow \qquad mv^2 = \frac{1}{4\Pi\varepsilon}\frac{e^2}{r}$$

$$\frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{1}{4\Pi\varepsilon}\frac{e^2}{r} = E_c$$

$$Ec = \frac{1}{8\Pi\varepsilon,}\frac{e^2}{r}$$

L'énergie de liaison dite aussi énergie mécanique est exprimée par la relation :

$$E_1 = Ep + Ec = -\frac{1}{4\Pi\varepsilon}\frac{e^2}{r} + \frac{1}{8\Pi\varepsilon,}\frac{e^2}{r}$$

$$E_1 = -\frac{1}{8\Pi\varepsilon,}\frac{e^2}{r}$$

Dans le cas général où la charge du noyau est donnée par Ze :

$$E_1 - -\frac{1}{8\Pi\varepsilon,}\frac{Ze^2}{r}$$

$$E_1 = \frac{1}{2}E_p$$

Insuffisance du modèle

Le raisonnement de Rutherford conduit l'atome à sa disparition. L'électron perd de énergie au cours du mouvement, s'approche au fur et à mesure du noyau. Pour une valeur ($r \approx 0$), celui-ci finit par tomber sur le noyau.

C'est pourquoi, Bohr est venu pour améliorer le modèle de l'atome d'hydrogène.

2 – MODÈLE SEMI CLASSIQUE (BOHR)

En 1913, Bohr faisa la corrélation entre l'énergie et le nombre d'onde.

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = hc\left(\frac{R_H}{n^2} - \frac{R_H}{p^2}\right)$$

$$E = hcR_H\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2}\right) = hc(Tn - Tp)$$

$$E = hcT_n - hcT_p = -(E_n - E_p) \qquad (T_n < T_p)$$

$$h\nu\,(n, p) = hc\,(T_n - T_p) = -(E_n - E_p)$$

Bohr en posant E = 0 quand n = ∞, conclut que l'énergie emmagasinée est une suite discontinue.
La nouvelle approche de Bohr va être basée sur trois postulats :

- Il y a un niveau d'énergie où l'électron ne peut plus rayonner de l'énergie.
- L'électron gravite autour du noyau tout en changeant de niveau en saut, sous l'effet d'une absorption ou une perte d'énergie.
- Le moment cinétique orbitale est une grandeur quantique.

$$mvr = n\,\eta$$

A partir du moment cinétique on peut déduire une expression du rayon qui est à son tour une valeur quantique.

$$mv = \frac{nh}{2\Pi r} \qquad \left(\eta = \frac{h}{2\Pi}\right)$$

En élevant au carré les deux membres, on aboutit à une expression de la forme,

$$mv^2 = \frac{n^2h^2}{4\Pi^2 r^2 m}$$

D'autre part en partant du bilan de forces,

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{4\Pi\varepsilon_, r^2}$$

Qui conduit à l'expression de mv^2,

$$mv^2 = \frac{e^2}{4\Pi\varepsilon_, r}$$

En égalisant les deux formes de mv^2, le rayon prend une valeur quantique (dépendant de n),

$$r = \frac{n^2h^2\varepsilon_,}{m\Pi e^2}$$

De même que l'énergie se transforme en valeur quantique

$$E_1 = -\frac{1}{8\Pi\varepsilon_,}\frac{e^2(m\Pi e^2)}{(n^2h^2\varepsilon_,)}$$

$$= -\frac{m.e^4}{8\varepsilon^2_, h^2}\cdot\frac{1}{n^2}$$

D'une manière générale, l'énergie de liaison de l'électron au noyau autre que celui de l'hydrogène est :

$$E_1 = -\frac{me^4}{8\varepsilon,h^2}.\frac{1}{n^2}$$

Par ailleurs, on peut donner une deuxième explication. La mécanique classique n'a aucun lien avec le spectre discret de l'hydrogène. Ce qui a laissé Bohr penser que l'électron change de niveau par saut.

- Cas simple :

En attribuant un terme spectral à chaque niveau, d'énergie égale à En.

$$En = -hcTn = -hc\frac{R_H}{n^2}$$

Cette grandeur repose sur l'hypothèse posée toujours par Bohr, que l'énergie est nulle à l'infini.

$$E = 0, \qquad n \rightarrow \infty$$

De la même manière en mécanique classique, l'énergie de liaison est nulle quand le rayon tend vers l'infini.

$$E = 0, \qquad r \rightarrow \infty$$

Si on considère l'énergie due à un changement de niveaux, soit de n à n + 1,

$$E(n+1) - En = -\left(\frac{hc.R_H}{(n+1)^2} - \frac{hc.R_H}{n^2}\right)$$

$$-(E(n+1) + En) = \left(\frac{hc.R_H}{(n+1)^2} - \frac{hc.R_H}{n^2}\right)$$

$$En = -\frac{R_H hc}{n^2} = -\frac{me^4}{8\varepsilon.h^2}\frac{1}{n^2}$$

Avec $$R_H = \frac{me^4}{8\varepsilon.^2.h^3c}$$

Après savoir remplacé les valeurs de m, e, h, c, et ε., la valeur calculée de R_H est trouvée proche à la valeur expérimentale.

R_H (cal.) = 1,097373197.10^7 m^{-1}
R_H (exp.) = 1,09677.10^7 m^{-1}

Les valeurs de l'énergie et celle du rayon dans le cas de l'orbite de Bohr prise comme circulaire, de l'état fondamental (n = 1) sont égales à :

$$r_1 = \frac{\varepsilon_0 h^2}{\Pi m e^2}.1 = 0{,}529.10^{-10} m \approx 0{,}53 \text{ A} = a_0$$

$$E_1 = -\frac{me^4}{8\varepsilon,^2 h^2} = -2{,}18.10^{-10} J = -13{,}6eV$$

- Cas générale (ions hydrogénoïdes).

L'application du modèle aux cas semblables à l'atome d'hydrogène, obtenus par ionisation des atomes à plusieurs électrons est montrée satisfaisante pour les particules à 1 seul électron. Soit par exemple :

$_3Li \rightarrow {}_3Li^+ + 1e$

$_3Li \rightarrow \underline{{}_3Li^{2+}} + 1e$

$_2He \rightarrow \underline{{}_2He^+} + 1^e$

Elément	Z (nombre de protons)	Nombre d'électron	Ion hydrogénoïde
He	2	1	He^+
Li	3	1	Li^{2+}
H	1	1	

Tableau 5: ions hydrogénoïdes

Les ions hydrogénoïdes sont des particules ionisées ressemblant à l'hydrogène par le nombre d'électrons. C'est un ion qu'on obtient pars ionisation à l'avant dernier stade. Dans ce cas, il ne possède qu'un seul électron. D'où la ressemblance à l'atome d'hydrogène. La liaison de l'électron au noyau quand celui-ci est en mouvement et soumis à la masse réduite µ est caractérisé par la distance et l'énergie.

$$r_n = -\frac{\varepsilon, h^2}{\Pi \mu Z e^2} n^2, \qquad \mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$$

$\left\{ \begin{array}{l} m_e : \text{masse de l'électron} \\ M : \text{masse du noyau} \end{array} \right.$

$$E_n = -\frac{\mu Z^2 e^4}{8\varepsilon,^2 h^2 n^2}$$

Si l'effet de masse est négligé, à ce moment là µ représente la masse réelle de l'électron (µ = m). Alors l'énergie et le rayon de l'hydrogénoïde sont calculés à partir des résultats de l'atome d'hydrogène.

$$E_n = -E_n(H).Z^2 = -\frac{13{,}6}{h^2}Z^2(eV)$$

$$r_n = r_n(H)\frac{1}{Z} = 0{,}529\frac{n^2}{Z} \quad (A°)$$

Insuffisance du modèle

- Le modèle ne peut pas expliquer le dédoublement des raies dans le spectre de l'atome d'hydrogène obtenu en présence du champ magnétique (effet Zeeman).
- Pour les atomes polyélectroniques, ce modèle ne peut pas rendre compte de position exacte des raies dans les spectres atomiques.

3 – MODÈLE DE SOMMERFELD (1868-1951)

Depuis que l'effet Zeeman est apparu, Sommerfeld, présentait des réticences au modèle de Bohr qui considérait les orbites comme circulaires définie par le nombre n. L'effet Zeeman, découvert en 1896 par le physicien néerlandais Piéter Zeeman, présente une modification du spectre d'émission d'une substance sous l'effet d'un champ magnétique. Ce phénomène a été observé en spectroscopie par Stark sous l'action d'un champ électrique intense. Le modèle de Bohr ne pouvait pas expliquer le dédoublement de raies. C'est pourquoi Sommerfeld Arnold, présenta les trajectoires électroniques en forme elliptiques (annexe 5) dont les axes sont déterminés en tenant compte des nombres quantiques m et l.

Insuffisance du modèle

Le modèle ne parvient pas à définir et à calculer l'énergie et la position de l'électron.

EXERCICES CORRIGES

6-1 1) calculer les différents niveaux d'énergie de l'atome d'hydrogène pour n allant de 1 à l'infini, les représenter sur un schéma.
2) Déterminer la longueur d'onde pouvant provoquer la transition d'un électron du niveau fondamental au niveau n =3
3) L'atome d'hydrogène dans son état fondamental absorbe un photon de longueur d'onde 8,5 m. L'électron est-il arraché ?
4) On considère l'atome d'hydrogène au niveau excité n = 4. Calculer la longueur d'onde des photons qu'il peut émettre lors de sa désexcitation. Dans quelle région du spectre sont elles situées?
5) Calculer l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène dans cet état excité.

6-2. On veut arriver à l'ion hydrogénoïde de Be (Z = 4).
Définir l'ion hydrogénoïde et montrer les étapes physiques qui mènent à son aboutissement.

Calculer l'énergie de liaison de l'ion hydrogénoïde par deux méthodes.
Exprimer cette énergie en fonction de celle de l'atome d'hydrogène dans chaque cas. On réalise l'ionisation complète par irradiation aux rayons X. La valeur de plus courte longueur d'onde absorbée est de 1,87 nm. A quoi peut il correspondre. Identifier l'élément après avoir calculer le nombre de charge.
On donne : $K= 1/4\pi\varepsilon_0 = 9.10^9$ SI ; $a_0=0,53$ A°.e=$1,6.10^{-19}$ C

6-3. L'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène, à partir de son état fondamental, est de 13,6 eV,
1) En partant de l'énergie du niveau, quelle est la radiation de plus courte longueur d'onde que peut émettre l'atome d'hydrogène ?
2) Donner l'expression de l'énergie caractérisant les différents états énergétiques de l'atome d'hydrogène en fonction du nombre quantique principal n. Calculer l'énergie du niveau caractérisé par n = 4.
3) Quelle est la longueur d'onde des radiations qui peuvent être émises lorsque l'atome se désexcite à partir de ce niveau ?

6-4. Dans l'atome d'hydrogène, l'énergie de l'électron dans son état fondamental est égale à -13,6 eV.
1) Quelle est en eV, la plus petite quantité d'énergie qu'il doit absorber pour
- passer au 1er état excité ?
- passer du premier état excité à l'état ionisé ?
2) Quelles sont les longueurs d'onde des raies du spectre d'émission correspondant au retour :
- de l'état ionisé au 1er état excité ?
- du premier état excité à l'état fondamental ?

6-4. On envoie une radiation monochromatique de longueur d'onde λ=23,7nm sur un hydrogénoïde de telle façon que l'électron atteigne le niveau n=5.

1) Définir cet hydrogénoïde.
2) Retrouver des relations simples permettant de calculer l'énergie, le rayon de l'orbite et la vitesse de l'électron sur ce niveau en partant de la théorie de Bohr. Calculer ces grandeurs.
3) Si on considère différent hydrogénoïdes: He^+, Li^{2+} et Ne^{9+}, que peut avoir l'effet du noyau sur la vitesse de l'e pris à l'état fondamental ? élargir au cas général.
4) On donne $R_H = 1,09677.10^7 m^{-1}$